بررسی تجربی و عددی ایجاد دانه سرگردان در فرآیند رشد تک‌بلور سوپرآلیاژ پایه نیکل*

محسن قنبری حقیقی[۱]		سعید شبستری[۲]		محمدرضا ابوطالبی[۳]

چکیده

جوانه‌زنی دانه‌های سرگردان در فرآیند رشد تک‌بلور به روش بریجمن در سرعت رشد ۳، ۵ و ۷ میلی‌متر بر دقیقه مورد ارزیابی قـرار گرفـت. بررسی‌ها نشان‌دهنده کاهش گرادیان دمایی در اثر افزایش سرعت حرکت نمونه از کوره و جوانه‌زنی دانه‌های سرگردان در جلوی جبهه رشـد دانه‌های ستونی است. بررسی‌های عملی رشد تک‌بلور سوپرآلیاژ پایه نیکل نشان داد که سرعت رشد ۳ میلی‌متر بر دقیقه منجر به ایجاد ساختار تک‌بلور با جهت بلوری نزدیک به <۰۰۱> در راستای خروج حرارت می‌شود. در سرعت‌های رشد بیش از ۳ میلی‌متر بر دقیقـه، جوانـه‌زنـی دانه هم‌محور رخ می‌دهد.

واژه‌های کلیدی رشد تک‌بلور، دانه‌های سرگردان، گرادیان دمایی، سرعت رشد، شبیه‌سازی عددی.

Numerical and Experimental Evaluation of Stray Grains Formation During Single Crystal Growth

M. Ghanbari		S. G. Shabestari		M. R. Aboutalebi

Abstract

Stray grain formation during single crystal growth with growth rates of 3, 5 and 7 mm/min has been assessed. The results revealed that increasing the growth rate resulted in the decrement of thermal gradient in the solidification front and caused stray grain formation in the solidification front of the columnar grain growth. Experimental and numerical results showed that a well-oriented <001> single crystal structure is obtained at a growth rate of 3 mm/min in Ni-based superalloy. Stray grain formation occurred at growth rates greater than 3 mm/min, as a result of high growth rate and low thermal gradient.

Key words Single Crystal Growth, Stray Grains Formation, Thermal Gradient, Growth Rate, Numerical Simulation.

* نسخهٔ نخست مقاله در تاریخ ۹۳/۲/۲۷ و نسخهٔ پایانی آن در تاریخ ۹۳/٦/۱ به دفتر نشریه رسیده است.

(۱) دانشجوی دکترا، قطب علمی فناوری آلیاژهای با استحکام بالا، دانشکده مهندسی مواد و متالورژی، دانشگاه علم و صنعت ایران.

(۲) استاد، قطب علمی فناوری آلیاژهای با استحکام بالا، دانشکده مهندسی مواد و متالورژی، دانشگاه علم و صنعت ایران.

(۳) استاد، قطب علمی فناوری آلیاژهای با استحکام بالا، دانشکده مهندسی مواد و متالورژی، دانشگاه علم و صنعت ایران.

DOI: 10.22067/ma.v28i2.35238

مقدمه

پره‌های تک‌بلور، ازجمله قطعات کلیدی در ساخت توربین‌های گازی هوایی و نیروگاهی با توان بالا محسوب می‌شود. تولید قطعات تک‌بلور به سبب دو ویژگی مهم موردتوجه است. نخست، در مقایسه با ساختارهای چندبلوری هم‌محور و جهت‌دار، ساختار تک‌بلور دارای مقاومت خزشی بالایی است. این امر به سبب حذف مرزدانه در راستای عمود بر اعمال تنش اتفاق می افتد. از سوی دیگر، ایجاد ساختار تک‌بلور با جهت بلوری <۰۰۱> در راستای طولی نمونه، سبب کاهش تخریب ناشی از خستگی حرارتی می‌شود. این امر به دلیل کمینه بودن مدول الاستیک در این راستا است [۱-٤].

به‌منظور ایجاد ساختار جهت‌دار، جبهه انجماد در یک گرادیان دمایی معین یک‌سویه با سرعت مشخص حرکت داده می‌شود. در این وضعیت، دانه‌های غیر مرجح نسبت به راستای خروج حرارت، در برخورد با دانه‌های با جهت‌گیری مرجح، متوقف می‌شوند. این پدیده تحت عنوان مکانیسم رشد رقابتی شناخته می‌شود و منجر به ایجاد یک بافت بلوری <۰۰۱> می‌گردد. در ساختارهای مکعبی، دانه‌ها تمایل دارند در راستایی رشد کنند که جهت بلوری <۰۰۱> در آن‌ها به‌موازات راستای خروج حرارت قرار گیرد. این جهت بلوری به‌عنوان جهت مرجح رشد در ساختارهای مکعبی شناخته می‌شود [۵].

به‌منظور ایجاد ساختار تک‌بلور، ابتدا یک ساختار ستونی با جهت بلوری مرجح و با مکانیسم رشد رقابتی ایجاد می‌شود. این بخش در قسمتی از قالب به نام بلوک آغازگر (starter block) انجام می‌شود. در ادامه، با استفاده از انتخاب‌کننده بلور، یک دانه با جهت بلوری مشخص از میان دانه‌های ستونی در حال رشد انتخاب شده و در گرادیان دمایی کنترل‌شده، دانه مذکور تا انتهای فرآیند انجماد رشد داده می‌شود [٦-۹].

یکی از عیوب رایج در ریخته‌گری قطعات تک‌بلور، ایجاد دانه‌های سرگردان در نمونه است که موجب افت خواص مکانیکی قطعه در دمای بالا می‌گردد. در سوپرآلیاژهای نسل سوم، با افزودن عناصر مقاوم‌ساز مرزدانه‌ای، نظیر کربن، مرزدانه‌های ناخواسته مستحکم می‌گردد و بدین‌صورت افت خواص مکانیکی کاهش می‌یابد [۱۰، ۱۱]. بااین‌وجود، جلوگیری از تشکیل دانه-های سرگردان در فرآیند رشد تک‌بلور سوپرآلیاژهای پایه نیکل به جهت جلوگیری از افت خواص مکانیکی اهمیت بسزایی دارد.

ساختار نمونه‌های منجمد شده در فرآیند انجماد جهت‌دار متأثر از گرادیان دمایی و سرعت رشد است [۱۲]. گرادیان دمایی ایجادشده در جبهه انجماد و همچنین سرعت سرد شدن متأثر از عوامل فرآیندی نظیر سرعت حرکت نمونه، دمای کوره، میزان خروج حرارت از مبرد و تابش در بخش سرد کوره است. تحقیقات نشان می‌دهد که با افزایش سرعت حرکت نمونه، گرادیان دمایی در مایع جلوی جبهه انجماد کاهش می-یابد. همچنین با افزایش دمای بخش داغ کوره، گرادیان دمایی درون مذاب افزایش می‌یابد [۱۲].

یکی از مواردی که سبب تشکیل دانه‌های سرگردان در رشد تک‌بلور می‌گردد، تبدیل رشد ستونی به هم-محور است. تبدیل رشد ستونی به هم‌محور به عواملی نظیر ترکیب آلیاژ، ابعاد قطعه ریختگی، فوق‌گذار، ضریب انتقال حرارت فصل مشترک جامد/ فلز و حضور عوامل جوانه‌زا بستگی دارد [۱۳-۱۵].

هانت و همکارانش مدلی برای تبدیل رشد ستونی به هم‌محور پیشنهاد کرده‌اند که بر پایه تحت تبرید در مذاب جلوی جبهه انجماد بوده و تأثیر ترکیب آلیاژ، دانسیته محل‌های جوانه‌زنی، گرادیان دمایی در مذاب و سرعت رشد نوک دندریت را بررسی می‌کند. وانگ و بکرمن نیز یک مدل تئوری برای محاسبه موقعیت تبدیل رشد ستونی به هم‌محور ارائه کرده‌اند [۱٦].

در تعدادی از آزمایش‌ها که در مقالات گزارش شده است، تبدیل رشد ستونی به هم‌محور هنگامی رخ می‌دهد که گرادیان دمایی در مذاب به یک مقدار کمینه بحرانی برسد [۱٤]. سوری و همکارانش انجماد

جهت‌دار آلیاژ آلومینیوم- مس را با مبردهای مسی و فولاد زنگ نزن و در محدوده وسیعی از فوق‌گذار موردمطالعه قرار داده‌اند. آن‌ها پس از مقایسه محل‌های تبدیل رشد ستونی به هم‌محور با مقادیر متناظر گرادیان دمایی و سرعت رشد، اظهار کرده‌اند که تحول زمانی رخ می‌دهد که $G_L < 0.74\ V_L^{0.64}$ باشد [۱۳].

بر اساس معیار هانت، در منطقه تحت تبرید مایع جلوی دندریت‌های ستونی، دانه‌های هم‌محور می‌توانند جوانه‌زنی و رشد کنند. اگر کسر حجمی اشغال‌شده توسط دانه‌های هم‌محور به‌اندازه کافی بزرگ باشد، جبهه رشد دانه‌های ستونی متوقف می‌شوند. رابطه (۱) بیانگر معیار هانت برای تبدیل رشد ستونی به هم‌محور است:

$$f_g = n_g \frac{4\pi}{81} \frac{\alpha^3}{(GR)^3} ((\frac{R}{\alpha})^{\frac{3}{2}} - \Delta T_n^3)^3 \quad (۱)$$

که در این رابطه f_g کسر حجمی جوانه‌های به وجود آمده در مذاب است. $\alpha, R, G, \Delta T$، n_g به ترتیب عبارت از بیشینه دانسیته جوانه در مذاب، بیشینه تحت تبرید جوانه‌زنی، گرادیان دمایی، سرعت پیشروی جبهه انجماد و ضریب سینتیکی رشد دندریت است [۱۶]. بنابراین، با توجه به این امر که G و R به‌عنوان عوامل فرآیندی قابل‌کنترل است، با انتخاب مناسب این دو پارامتر برای یک آلیاژ با ترکیب شیمیایی مشخص، جلوگیری از تشکیل دانه‌های هم‌محور ممکن می‌شود. همچنین تأثیر ترکیب شیمیایی آلیاژ بر فرآیند تبدیل ستونی به هم‌محور ناشی از تأثیر ترکیب شیمیایی بر ضریب سینتیکی رشد است. برای یک سیستم آلیاژی معین با افزایش غلظت عنصر آلیاژی، مقدار عددی α کاهش یافته و تبدیل رشد ستونی به هم‌محور ترغیب می‌شود. بر این اساس، موارد زیر سبب ترغیب تشکیل دانه‌های هم‌محور می‌گردد:

۱. کاهش گرادیان دمایی (G)
۲. افزایش سرعت پیشروی جبهه انجماد (R)
۳. کاهش ضریب سینتیکی رشد دندریت (α) ناشی از ترکیب شیمیایی آلیاژ
٤. کاهش تحت تبرید جوانه‌زنی (ΔT_n).

جهت جلوگیری از بروز تبدیل رشد ستونی به هم-محور در یک آلیاژ با ترکیب شیمیایی مشخص، کنترل عوامل فرآیندی ازجمله G و R اهمیت دارد. معیار هانت به‌عنوان ابزاری جهت تعیین شرایط بهینه رشد تک‌بلور، شامل گرادیان دمایی و سرعت رشد، به‌منظور جلوگیری از تشکیل دانه‌های سرگردان مورداستفاده قرار می‌گیرد. در این تحقیق شرایط بهینه رشد تک‌بلور سوپرآلیاژ پایه نیکل GTD-111 با استفاده از روش شبیه‌سازی عددی تعیین و با نتایج حاصل در فرآیند تجربی رشد بلور مورد ارزیابی قرار گرفته است. به‌منظور شبیه‌سازی عددی فرآیند رشد تک‌بلور، از روش ترکیبی المان محدود و سلول‌های خودکار (CAFE) استفاده شده است. روش عددی مذکور در مطالعات محققان در پیش‌بینی ساختار انجمادی آلیاژهای مختلف به‌طور وسیع مورد استفاده قرار گرفته است [۱۷-۲۱].

روش تحقیق

یکی از اهداف مهم در این تحقیق بررسی توسعه ساختار انجمادی با استفاده از مدل محاسباتی CAFE (Cellular Automaton Finite Element) است. روش مذکور به‌شدت وابسته به سینتیک رشد دانه بوده و نسبت به تغییرات دمایی حین فرآیند حساس است [۱۷، ۱۸]. بدین منظور تعیین تغییرات دمایی در میدان محاسباتی با دقت مناسب جهت دستیابی به نتایج مطلوب در بخش ریزساختاری ضروری است.

در این تحقیق، جهت تعیین توزیع دما در میدان محاسباتی از روش مدل‌سازی عددی به روش المان محدود استفاده شد. برای این منظور از نرم‌افزار المان محدود Procast بهره برده شد. نرم‌افزار مذکور جهت تعیین دما در میدان محاسباتی، معادله حاکم بر انرژی و مومنتوم را با توجه به خواص فیزیکی و حرارتی مواد موجود، شرایط مرزی مناسب و ضرایب انتقال حرارت

در فصل مشترک‌ها، به روش تکرار و بر اساس معیار همگرایی تعیین‌شده حل می‌نماید.

برای تعیین دما (T) در هر گره و درنتیجه تعیین توزیع دما در میدان محاسباتی در بازه زمانی مشخص، معادله انرژی مطابق رابطه (۲) و با آگاهی از تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه (C_p)با استفاده از روش گسسته سازی المان محدود حل می‌گردد. با توجه به عدم وجود تلاطم در مذاب، از حل معادلات مومنتوم صرف‌نظر شده است.

$$\rho\frac{\partial H}{\partial t}=\nabla(k\nabla T)+Q \qquad (۲)$$

که در آن ρ دانسیته، k ضریب هدایت حرارتی و H میانگین حجمی آنتالپی در هر سلول محاسباتی است. مقدار آنتالپی در بررسی انتقال حرارت درون مذاب از روابطی که در ادامه اشاره می‌شود، به دست می‌آید:

۱. میانگین حجمی آنتالپی برای فاز جامد:

$$H_s=\int_{T0}^{T}C_{p,s}dT \qquad (۳)$$

۲. میانگین حجمی آنتالپی برای فاز مذاب:

$$H_l=\int_{T0}^{T}C_{p,l}dT+L_f \qquad (٤)$$

که در رابطه ذکرشده، $C_{p,l}$ و $C_{p,s}$ و L_f به ترتیب برابر گرمای ویژه در حالت مذاب و جامد و گرمای نهان گداز است [۱٦].

۳. میانگین حجمی آنتالپی برای ناحیه دوفازی (خمیری) از رابطه (۵) حاصل می‌شود:

$$H=f_l H_l+(1-f_l)H_s \qquad (۵)$$

که در رابطه فوق f_l برابر کسر مذاب است و تغییرات آن با در نظر گرفتن مدل انجمادی مناسب با استفاده از داده‌های ترمودینامیکی نرم‌افزار محاسبه می‌شود. در محاسبات انجام‌شده در این پژوهش، از مدل انجمادی نفوذ برگشتی (back diffusion) بر اساس سرعت سرد شدن حاصل از اندازه‌گیری تجربی تغییرات دما، جهت بررسی تغییرات کسر جامد استفاده شده است.

مقدار Q در رابطه (۲)، گرمای مبادله شده با محیط در اثر تابش در نظر گرفته شده است. نرم‌افزار المان محدود توانایی شبیه‌سازی انتقال حرارت تابشی بین جداره کوره و قالب با محاسبه زوایای دید را دارا است. برای این منظور از رابطه استفان–بولتزمن جهت محاسبه انتقال حرارت تابشی بهره برده می‌شود [۲۲]. در تحلیل تبادل پرتو برای سطوح غیر سیاه لازم است این واقعیت در نظر گرفته شود که سطوح گوناگون انعکاس و جذب‌های متفاوتی دارند. مطابق رابطه (٦) شار انرژی خالص نشر شده توسط یک سطح به‌صورت مجموع انرژی نشر شده از این سطح و انرژی جذب‌شده از سطوح دیگر در حال نشر است [۲۳].

$$q_{out,k}=\varepsilon_k\sigma T_k^4+\rho_k q_{in,k} \qquad (٦)$$

در این رابطه $q_{out,k}$، شار انرژی نشر شده از سطح k، ε_kضریب نشر سطح k، σ ثابت بولتزمن، $q_{in,k}$ شار انرژی جذب‌شده از محیط پیرامون است.

محاسبات تبادل پرتو میان سطوح با تعریف ضریب دید، F_{jk} ، میسر می‌گردد که با این تعریف می‌توان کسر پرتو تابیده‌شده توسط یک سطح و دریافت شده توسط سطح دوم را یافت. ضریب دید F_{jk} کسری از انرژی نشر شده توسط سطح k است که توسط سطح j جذب‌شده است.

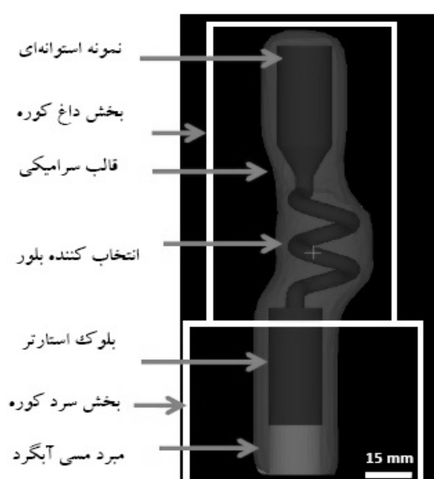
بخش‌های مختلف میدان محاسباتی در مدل‌سازی عددی، بر اساس اجزای سیستم اصلی رشد بلور موردبررسی در این تحقیق طراحی گردید (شکل (۱)).

انتقال حرارت بین مذاب و مبرد در فصل مشترک بلوک آغازگر و مبرد مسی آبگرد انجام می‌شود. با توجه به این امر که وضعیت فصل مشترک مذکور حین انجماد تغییر می‌نماید، ضریب انتقال حرارت در این فصل مشترک با دما متغیر در نظر گرفته می‌شود. به‌منظور تعیین ضرایب انتقال حرارت در فصل مشترک نمونه/مبرد و نمونه/قالب سرامیکی از روش عددی مدل‌سازی معکوس نرم‌افزار Procast استفاده شد. بدین

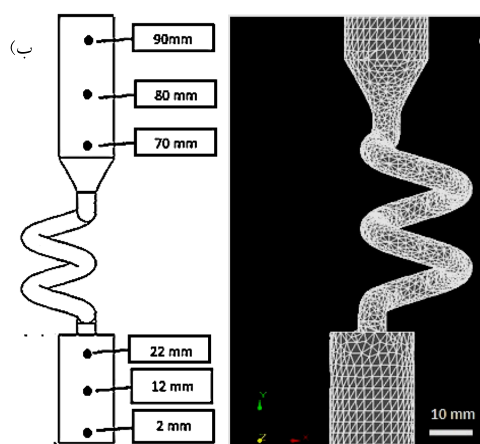
منظور ابتدا با استفاده از آنالیز حرارتی تغییرات دمای دو نقطه درون مذاب در فواصل ۲ و ۸۰ میلی‌متری از سطح مبرد (مطابق شکل (۲)) با استفاده از ترموکوپل کالیبره اندازه‌گیری شد. منحنی سرد شدن حاصل به‌صورت فایل متنی قابل بازخوانی توسط نرم‌افزار ذخیره شد. ضرایب انتقال حرارت در میدان محاسباتی با استفاده از روش تکرار و با در نظر گرفتن یک مقدار اولیه برای ضریب انتقال حرارت، h_0، با اختلاف کمتر از ۵ واحد مورد محاسبه قرار گرفت.

انتقال حرارت بین دیواره خارجی قالب سرامیکی و دو بخش داغ و سرد کوره در طول فرآیند، با توجه به زاویه دید دو سطح و بر اساس مکانیسم تابش انجام می‌شود. به سبب جابجایی نسبی نمونه و کوره، زاویه دید در طول فرآیند متغیر است. همچنین دما در بخش داغ و سرد کوره ثابت در نظر گرفته می‌شود. در بررسی انجام‌شده در این تحقیق ضریب انتقال حرارت بین نمونه و قالب سرامیکی ثابت و برابر $250\ W.m^{-2}.K^{-1}$ فرض شده است.

جهت انجام محاسبات عددی انتقال حرارت همراه انجماد به روش المان محدود، مش سطحی مثلثی و مش حجمی چهاروجهی بر میدان محاسباتی اعمال گردید. مش اعمالی در بخش‌هایی که انجماد در آن‌ها صورت می‌گیرد (شامل بلوک آغازگر، انتخاب‌کننده بلور و نمونه استوانه‌ای) ظریف‌تر انتخاب شد. پس از بررسی‌های انجام‌گرفته با سعی و خطا و ارزیابی عملکرد مدل عددی با استفاده از نتایج تجربی موجود در منابع مطالعاتی و سیستم فیزیکی رشد بلور، ابعاد مش اعمالی به‌منظور عدم وابستگی نتایج به مش‌بندی، ۲ میلی‌متر در نظر گرفته شد. مش اعمالی در بخش قالب سرامیکی و مبرد مسی آبگرد ۵ میلی‌متر در نظر گرفته شد. در شکل (۲) نمونه مش بندی اعمالی و نقاط موردبررسی دمایی در نمونه مشخص شده است.



شکل ۱ اجزای میدان محاسباتی در شبیه‌سازی عددی انتقال حرارت و انجماد



شکل ۲ الف) نمونه مش بندی چهاروجهی المان محدود؛ ب) نقاط موردبررسی دمایی جهت تعیین گرادیان دمایی و سرعت سرد شدن نمونه

در این پژوهش به‌منظور شبیه‌سازی عددی ساختار انجمادی از روش سلول‌های خودکار (CA) استفاده شده است. بر اساس آنچه هیسیلبارت و گوبل جهت شبیه‌سازی تشکیل دانه در فرآیند تبلور مجدد ارائه نموده‌اند، مدل CA از قواعد زیر تبعیت می‌کند [۱۸]:

۱. فضا به بخش‌های مساوی (سلول‌ها) تقسیم می‌شود. در یک مدل CA دوبعدی، سلول‌ها به شکل مربع و یا شش‌ضلعی هستند.

۲. برای هر سلول روابطی با همسایگان آن تعریف می-

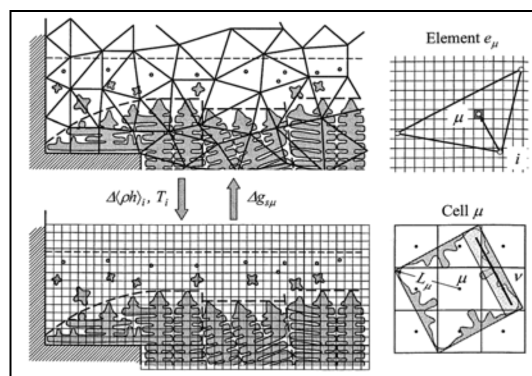
شود.

۳. هر سلول با یک سری متغیر تعریف می‌شود (برای مثال دما و جهت بلوری). همچنین برای هر سلول یک حالت فیزیکی (مایع و یا جامد) تعیین می‌شود.

٤. قوانین گذار (برای مثال گذار از مایع به جامد) که وضعیت سلول را در یک بازه زمانی تعیین می‌کند، توسط متغیرها و یا حالات اختصاص‌یافته به همسایگان مجاور تعیین می‌شود.

به‌منظور شبیه‌سازی تشکیل دانه‌ها در فرآیند انجماد توسط CA، ابتدا شبکه‌بندی منظم در میدان محاسباتی صورت می‌گیرد. ابعاد سلول‌های مربعی شکل مورداستفاده در این پژوهش برابر ۱۰۰ میکرومتر در نظر گرفته شد.

در ساده‌ترین شبیه‌سازی انجام‌شده توسط CA، ارتباط بین نزدیک‌ترین همسایگان، برای هر سلول مدنظر قرار داده می‌شود. برای سلول‌های مربعی در دو بعد، همسایگان در چهار جهت شمال، جنوب، غرب و شرق قرار دارند. ازآنجاکه برای شبیه‌سازی انتقال حرارت در فرآیند، از روش المان محدود استفاده می‌شود، ابتدا میدان محاسباتی به‌منظور محاسبه توزیع دما مش‌بندی می‌گردد. بنابراین هر المان می‌تواند متشکل از چندین سلول باشد. (شکل(۳)) سلول‌هایی که درون یک المان قرار دارند طبیعتاً دارای دمای واحدی برابر دمای آن المان می‌باشند.



شکل ۳ ارتباط میان سلول‌ها و المان‌های محدود در میدان محاسباتی [۱۸]

در ابتدای فرآیند، به تمام سلول‌ها دمایی برابر و بالاتر از دمای منحنی مایع، اختصاص داده می‌شود. همچنین یک عدد مشخصه که تعیین‌کننده حالت هر سلول است (صفر و یک به ترتیب برای حالات مایع و جامد) به سلول تخصیص داده می‌شود. در ابتدای فرآیند حالت تمامی سلول‌ها مایع است و بنابراین به همه آن‌ها عدد صفر اختصاص داده می‌شود. با آغاز شبیه‌سازی و با هر بازه زمانی، دمای هر سلول با استفاده از محاسبات انتقال حرارت توسط روش عددی المان محدود محاسبه می‌شود. به‌محض رسیدن دما در یک سلول به دمای منحنی مایع، وضعیت سلول از مایع به جامد تغییر می‌کند. مکان‌های جوانه‌زنی درون مذاب به‌صورت اتفاقی و مطابق آنچه در ادامه توضیح داده می‌شود، تشکیل می‌شوند. همچنین فرآیند رشد دانه با رویه مونت‌کارلو صورت می‌گیرد.

در یک بازه زمانی، δt، دمای هر سلول به‌اندازه δT افت می‌کند. بنابراین مقدار تحت تبرید به‌اندازه $\delta(\Delta T)$ افزایش می‌یابد. بر این اساس، دانسیته دانه‌های جدید که در حجم مذاب به وجود می‌آیند، با استفاده از رابطه (۷) حاصل می‌شود [۱۸]:

$$\delta n_v = n_v[\Delta T+\delta(\delta T)] - n_v(\Delta T) = \int_{\Delta T}^{[\Delta T+\delta(\delta T)]} \frac{dn_v}{d(\Delta T')} d(\Delta T')$$

$$\delta n_v . v = \delta N_v \qquad (۷)$$

که در این معادلات، n_v تعداد جوانه‌ها در واحد حجم و N_v، تعداد کل جوانه‌ها در حجم مذاب، v ، است. جهت تعیین مکان جوانه‌ها در بین سلول‌ها، ابتدا یک عدد تصادفی، r، بین صفر و یک به هر سلول اختصاص داده می‌شود. سپس بر اساس معادله جوانه‌زنی که در بالا ارائه شد، یک عدد احتمالی تعیین می‌شود [۱۸]:

$$p_v = \frac{\delta N_v}{N_{CA}} = \delta n_v . V_{CA} \qquad (۸)$$

که در این رابطه، N_{CA} و V_{CA} به ترتیب تعداد کل سلول‌ها و حجم کل سلول‌ها است. در این حالت، چنانچه $r<p_v$ باشد، وضعیت از مایع به جامد تغییر نموده و یک جوانه به وجود می‌آید. هنگامی‌که یک جوانه جدید به وجود آمد، یک عدد طبیعی که معرف

جهت بلوری است و به‌صورت تصادفی انتخاب می‌شود. در مختصات دوبعدی، ٤٨ جهت بلوری می‌توان در نظر گرفت که اختلاف آن‌ها کمتر از ۲ درجه است [۱۸].

به‌منظور شبیه‌سازی ریزساختار با استفاده از مدول CAFE، دانسیته جوانه به وجود آمده در فصل مشترک بین مبرد و مذاب، از رابطه (۹) که توسط اُلدفیلد ارائه شده است، با میزان تحت تبرید مرتبط می‌شود [٢٤]:

$$n(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \frac{dn_v}{d(\Delta T')} d(\Delta T') \quad (۹)$$

با در نظر گرفتن از بین رفتن مکان‌های جوانه‌زنی پیشین توسط جوانه‌های به وجود آمده، رابطه (۹) به‌صورت رابطه (۱۰) ارائه می‌شود [١٦]:

$$n(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \frac{dn_v}{d(\Delta T')} [1 - f_s(T')] d(\Delta T') \quad (۱۰)$$

که در آن f_s کسر حجمی مذاب منجمد شده است و از مدل انجمادی نفوذی متناسب با سرعت سرد شدن به دست می‌آید. سرعت سرد شدن بر اساس نتایج تجربی حاصل از آنالیز حرارتی استنتاج می‌شود. جهت انتگرال‌گیری از رابطه (۹)، معمولاً یک تابع توزیع گوسی استفاده می‌شود. این تابع دارای سه پارامتر است که عبارت‌اند از: میزان تحت تبرید بیشینه (ΔT_{max})، چگالی نهایی دانه‌ها(n) و انحراف معیار(ΔT_σ) [١٦]. بر اساس منابع مطالعاتی و برای آلیاژ موردبررسی در این تحقیق مقادیر فوق به ترتیب ۷ درجه سانتی‌گراد، $۱^{۹}$ □ ۱ دانه بر مترمکعب و ۰/۵ درجه سانتی‌گراد منظور گردید.

سرعت رشد دندریت با توجه به مدل ارائه‌شده توسط Kurz-Giovanola-Trivedi (KGT) که در [۲۵] ارائه شده است، در یک مذاب با میزان تحت تبرید آن به‌صورت رابطه (۱۱) در مدول CAFE مورداستفاده قرار می‌گیرد [۲۵].

$$v = \alpha_2 \Delta T^2 + \alpha_3 \Delta T^3 \quad (۱۱)$$

که در این رابطه α ثابت سینتیکی رشد، v سرعت نوک دندریت و ΔT تحت تبرید نوک دندریت است. تعیین ارتباط سرعت رشد دندریت با میزان تحت تبرید (رابطه ۱۱)، از حل همزمان روابط (۱۲) الی (١٤) حاصل می‌شود. شعاع نوک دندریت، R، و سرعت رشد، v، توسط روابط زیر مشخص می‌شوند:

$$\Omega = \frac{c^* - c_0}{c^*(1-k)} = Iv(pe) \quad (۱۲)$$

$$R = 2\pi \sqrt{\left(\frac{\Gamma}{mG_c\xi_c - G}\right)} \quad (۱۳)$$

$$Pe = \frac{Rv}{2D} \quad (١٤)$$

که در این روابط Ω، فوق اشباع، C_0، ترکیب اولیه، C^*، غلظت نوک دندریت، k، ضریب توزیع تعادلی و Iv(Pe)، تابع ایوانستف عدد Pe است. همچنین Γ، ضریب گیبس-تامسون، G_c، گرادیان غلظتی در نوک دندریت، G، گرادیان دمایی در مذاب، D، ضریب نفوذ در مذاب، m، شیب منحنی مایع و ξ_c تابعی از Pe که در سرعت رشد آهسته برابر واحد است. میزان تحت تبرید ΔT، توسط رابطه (۱۵) با فوق اشباع، Ω، مرتبط است [٢٤]:

$$\Delta T = mc_0 \left[1 - \frac{1}{1 - \Omega(1-k)}\right] \quad (۱۵)$$

با در نظر گرفتن روابط (۱۲) الی (۱۵) و محاسبات مربوطه توسط نرم‌افزار Procast، مقادیر α_2 و α_3 برای سوپرآلیاژ پایه نیکل GTD-111 با ترکیب شیمیایی ارائه‌شده در جدول (۱) به ترتیب برابر 4.1×10^{-7} $m.s^{-1}.K^2$ و 6.6×10^{-7} $m.s^{-1}.K^3$ مورد محاسبه قرار گرفت.

جدول ۱ ترکیب شیمیایی سوپرآلیاژ GTD-111

Cr	Co	Mo	W	Al	Ti	Ta	Zr
13.5	9.41	1.68	3.69	3.40	4.88	3.90	0.01
C	Cu	S	P	Mn	Si	Nb	Fe
0.09	0.012	0.001	0.003	0.001	0.02	0.05	0.02

کوره انجماد جهت‌دار مورد استفاده، از یک بخش داغ تشکیل شده است. بخش مذکور از یک لوله از جنس گرافیت فشرده تهیه شده است. یک کویل القایی RF سبب گرمایش گرافیت تا دمای حدود ۱٦۰۰ درجه سانتی‌گراد شده و تابش بین کوره و قالب صورت می‌گیرد. قالب سرامیکی از جنس آلومینا بر روی یک پایه مبرد آبگرد قرار گرفته و مجموعه قالب و مبرد قابلیت حرکت در راستای z با سرعت معین را دارد. سرد شدن نمونه توسط مبرد آبگرد و همچنین تابش بین دیواره قالب با اطراف انجام می‌شود.

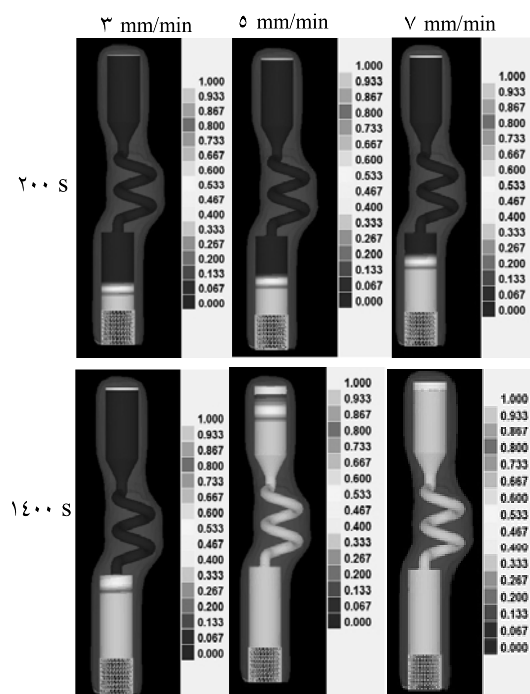
بررسی‌های ریزساختاری نمونه‌های تک‌بلور سوپرآلیاژ پایه نیکل با استفاده از میکروسکوپ نوری (مدل MEIJI) انجام شد. جهت آشکارسازی ریزساختار از محلول ماربل با ترکیب شیمیایی $10grCuSO_4$ +50cc HCl +50cc H_2O استفاده شد.

به‌منظور ارزیابی جهات کریستالی تک‌بلور نهایی در راستای بلوری مشخص از آنالیز الگوی پراش الکترون-های برگشتی (EBSD) استفاده شد. بدین منظور از آشکارساز نصب‌شده بر روی دستگاه میکروسکوپ الکترونی روبشی مدل Zeiss و نرم‌افزار HKL جهت آنالیز تصاویر قطبی و نقشه جهات بلوری استفاده شد. جهت آماده‌سازی نمونه به‌منظور بررسی جهات بلوری با استفاده از EBSD، نمونه‌ها پس از سنباده‌زنی با نمد پولیش و خمیر الماس تا سایز ٤۰۰ نانومتر پولیش شد. به‌منظور از بین بردن ناصافی‌های موجود، با استفاده الکتروپولیش در الکترولیتی از اسید فسفریک، گلیسیرین و آب در ولتاژ مناسبی که به‌صورت تجربی حاصل شد، پولیش گردید.

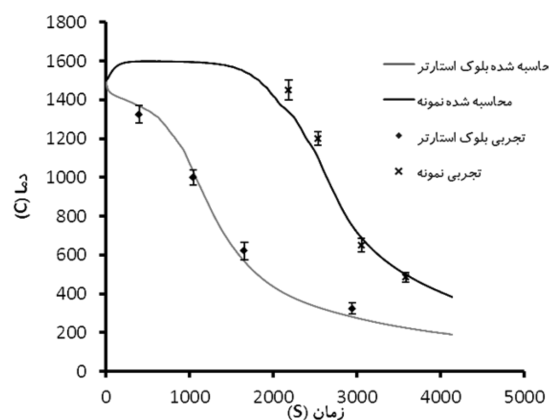
نتایج و بحث

در شکل (٤) تغییرات کسر حجمی منجمد شده نمونه سوپرآلیاژ پایه نیکل در سرعت حرکت۳، ۵ و ۷ میلی‌متر بر دقیقه در دو زمان ۲۰۰ و ۱٤۰۰ ثانیه به‌عنوان نمونه ارائه شده است.

مطابق شکل (٤) در سرعت حرکت بالاتر، کسر حجمی جامد بیشتری در زمان‌های کوتاه‌تر حاصل می-شود. این امر نشان‌دهنده ایجاد سرعت سرد شدن بالاتر در سرعت‌های حرکت بیشتر است. همچنین تغییرات سرعت سرد شدن نمونه (T□ یا G.R) و گرادیان دمایی (G) مطابق آنچه از محاسبات حاصل شده است، در ادامه ارائه شده است. نمونه موردبررسی به‌منظور حصول گرادیان دمایی لازم برای مدت‌زمان ۱۵ دقیقه در فوق گداز ۲۰۰ درجه سانتی‌گراد نگهداری شده است. این پدیده ناشی از تأثیر بیشتر پدیده تابش در دماهای بالا است. بدین معنا که با افزایش دما، میزان گرمای منتقل‌شده توسط تابش افزایش یافته و درنتیجه سبب کاهش سرعت سرد شدن نمونه حتی در تماس با مبرد آبگرد می‌گردد. شکل (۵) مقایسه‌ای بین نتایج تجربی و محاسبه شده تغییرات منحنی سرد شدن در بلوک آغازگر و نمونه استوانه‌ای را ارائه نموده است. نتایج، نشان‌دهنده نزدیک بودن داده‌های تجربی و محاسبه‌شده پس از اصلاح ضرایب انتقال حرارت است.



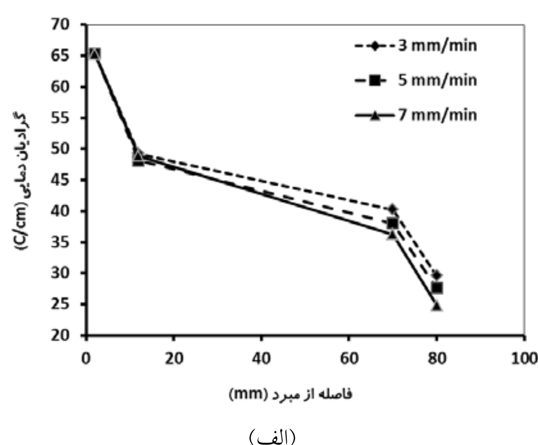
شکل ٤ روند تغییرات کسر جامد برای سه سرعت ۳، ۵ و ۷ میلی‌متر بر دقیقه در زمان‌های ۲۰۰ و ۱٤۰۰ ثانیه



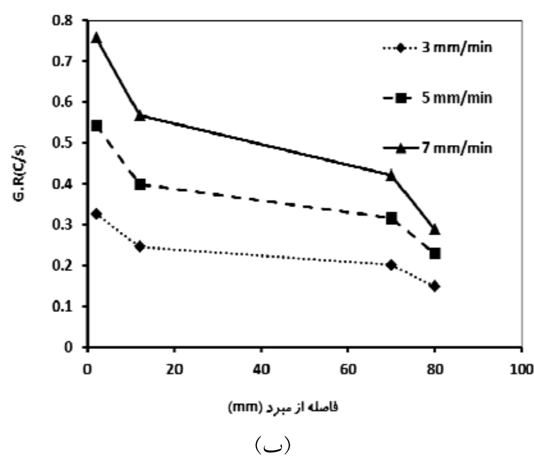
شکل ۵ مقایسه نتایج تجربی و شبیه‌سازی‌شده حین سرد شدن سوپرآلیاژ پایه نیکل در دو نقطه درون بلوک آغازگر و نمونه استوانه‌ای

در شکل (٦) نتایج حاصل از بررسی تغییرات گرادیان دمایی و همچنین سرعت سرد شدن نمونه (G.R) در سرعت‌های ۳، ۵ و ۷ میلی‌متر بر دقیقه در فواصل مختلف از سطح مبرد مطابق شکل (۲) ارائه شده است. همان‌گونه که در شکل (٦- الف) مشاهده می‌شود، گرادیان دمایی در بخش بلوک آغازگر، چندان متأثر از سرعت رشد نبوده و برای همه سرعت‌های حرکت نمونه، تقریباً عددی یکسان است. در بخش‌های بالایی نمونه، گرادیان دمایی با افزایش سرعت حرکت نمونه کاهش می‌یابد. همچنین نمودار (٦- ب) نشان‌دهنده آن است، که با افزایش سرعت حرکت نمونه، سرعت سرد شدن در یک مکان مشخص از نمونه، افزایش می‌یابد. این مسئله به سبب خروج بیشتر حرارت از نمونه به شیوه تابش بین بخش منجمد شده و محیط سرد با افزایش سرعت حرکت نمونه است. درواقع افزایش سرعت حرکت نمونه منجر به افزایش زاویه دید بین نمونه و محیط سرد می‌گردد.

بر اساس نتایج ارائه‌شده در شکل (٦- الف)، با افزایش فاصله از سطح مبرد، گرادیان دمایی کاهش می‌یابد. این امر به سبب کاهش قدرت سردکنندگی از قسمت‌های پایینی نمونه است. براساس تحقیقات انجام‌شده، این مسئله سبب می‌گردد تا در قطعات بزرگ فرآیند رشد با مشکل جوانه‌زنی دانه‌های سرگردان مواجه شود [۲٦]. به‌منظور جبران این ضعف، فرآیند رشد تک‌بلور به روش سرد کردن در حمام مذاب فلز (Liquid Metal Cooling) LMC توسعه یافته و مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این روش دستیابی به گرادیان‌های دمایی بیشتر جهت کاهش عیوب ساختاری و همچنین بهبود خواص نهایی امکان‌پذیر است [۲٦].



(الف)



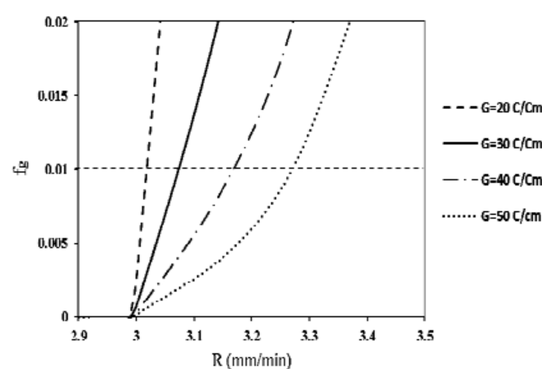
(ب)

شکل ٦ نتایج شبیه‌سازی‌شده الف) تغییرات گرادیان دمایی؛ ب) سرعت سرد شدن (G/R) در سرعت‌های سرد شدن ۳، ۵ و ۷ میلی‌متر بر دقیقه در نقاط مختلف نمونه

افزایش گرادیان دمایی جهت حصول به ساختار تک‌بلور مناسب، ضروری است. چنانچه گرادیان دمایی کافی در جبهه انجماد حاصل نشود، امکان جوانه‌زنی

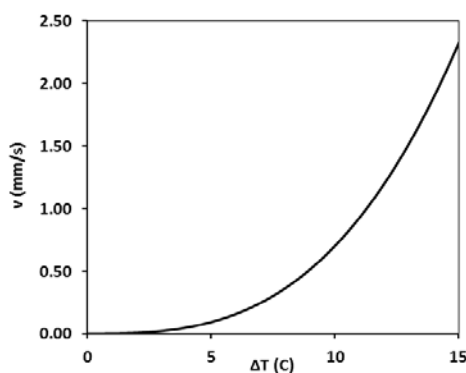
دانه‌های جدید و ایجاد دانه‌های سرگردان محتمل است. کاهش گرادیان دمایی در اثر افزایش سرعت رشد و یا کاهش دمای کوره، سبب کاهش گرادیان دمایی و متعاقباً سبب جوانه‌زنی دانه‌های سرگردان خواهد شد [۲۷، ۲۸].

آنچه در این تحقیق به‌عنوان معیاری به‌منظور تعیین کمترین گرادیان دمایی لازم جهت فرآیند رشد بلور ضرورت دارد، معیار هانت (رابطه ۱) برای تعیین شرایط تبدیل دانه‌های ستونی به هم‌محور است [۱٦]. شکل (۷) نشان دهنده تغییرات f_g برای سوپر آلیاژ پایه نیکل برحسب سرعت رشد برای گرادیان‌های دمایی نشان داده‌شده است. شکل (۷) درواقع نمود ترسیمی از معادله (۱) است. جهت جلوگیری از جوانه‌زنی دانه جدید در جلوی جبهه انجماد، مقدار عددی f_g باید کمتر از ۰/۰۱ باشد.



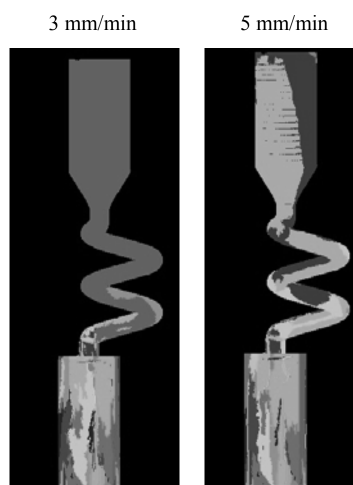
شکل ۷ نمودار تغییرات f_g برحسب سرعت رشد برای مقادیر مشخص شده گرادیان دمایی که از رابطه (۱) و برای سوپر آلیاژ پایه نیکل استخراج شده است

بنابر نمودار شکل (۷)، برای سوپر آلیاژ پایه نیکل در گرادیان دمایی ۲۰ الی ۳۰ درجه بر سانتیمتر، سرعت رشد نباید از ۳ میلی‌متر بر دقیقه تجاوز نماید. همان‌گونه که در شکل (٦) مشاهده می‌شود، گرادیان دمایی در سرعت رشد بیش از ۳ میلی‌متر بر دقیقه به کمتر از ۳۰ درجه بر سانتی‌متر افت می‌کند. این پدیده در فواصل بالاتر نسبت به سطح مبرد بیشتر به وجود می‌آید. به‌منظور بررسی تحلیل ارائه‌شده، نتایج شبیه‌سازی عددی ریزساختار انجمادی و همچنین نتایج تجربی رشد تک‌بلور سوپر آلیاژ پایه نیکل موردبررسی قرار گرفته است. همان‌گونه که پیشتر نیز اشاره شد، جهت شبیه‌سازی ساختار انجمادی، اطلاع از سرعت رشد نوک دندریت از اهمیت بالایی برخوردار است. بر اساس مقادیر حاصل از محاسبه ضریب سینتیکی رشد، نمودار تغییرات سرعت رشد دندریت برحسب میزان تحت تبرید به‌صورت منحنی شکل (۸) است. شبیه‌سازی عددی رشد دانه به روش عددی CAFE، بر اساس منحنی ارائه‌شده در این شکل صورت می‌گیرد.



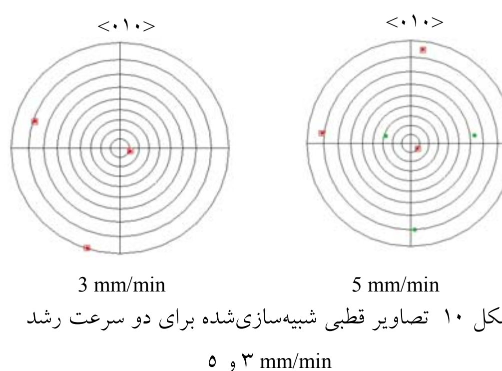
شکل ۸ تغییرات سرعت نوک دندریت برحسب میزان تحت تبرید در نوک دندریت

تکرار متعدد شبیه‌سازی عددی با مدول CAFE برای سوپرآلیاژ پایه نیکل در سرعت‌های بیش از ۳ میلی‌متر بر دقیقه نشان می‌دهد که دستیابی به تک‌بلور در سرعت‌های مذکور ممکن نیست. در شکل (۹) نتایج شبیه‌سازی دانه‌بندی ایجادشده برای دو نمونه با سرعت‌های حرکت نمونه ۳ و ۵ میلی‌متر بر دقیقه ارائه شده است.



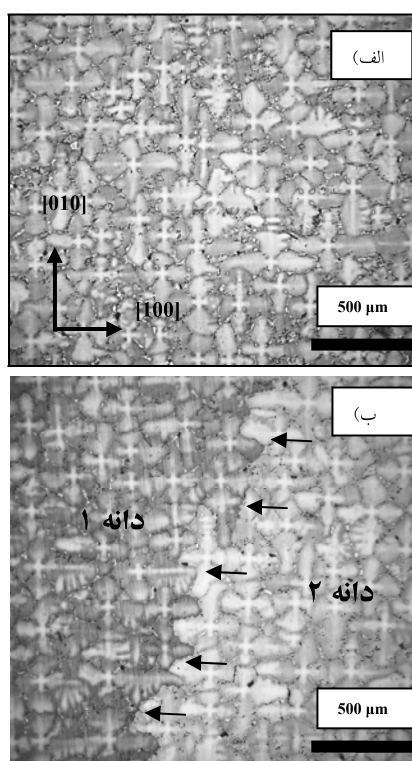
شکل ۹ نتایج شبیه‌سازی ریزساختار انجمادی سوپر آلیاژ پایه نیکل در دو سرعت رشد ۳ و ۵ میلی‌متر بر دقیقه

همان‌گونه که در این تصاویر مشاهده می‌شود، در مورد نمونه با سرعت حرکت ۵ میلی‌متر بر دقیقه تک‌بلور حاصل نشده است. در مورد نمونه با سرعت حرکت ۳ میلی‌متر بر دقیقه ساختار تک‌بلور حاصل شده است. در تصویر (۱۰) نیز تصاویر قطبی حاصل از شبیه‌سازی عددی برای دو نمونه نشان داده شده، ارائه شده است. این تصاویر نشان‌دهنده ایجاد دو دانه با انحراف ۱۰ و ۲۹ درجه در نمونه رشد داده شده با سرعت حرکت ۵ میلی‌متر بر دقیقه و تشکیل تک‌بلور با انحراف ۱۱ درجه نسبت به راستای <۰۰۱> در نمونه با سرعت حرکت ۳ میلی‌متر بر دقیقه است. دانه با اختلاف جهت ۲۹ درجه نسبت به راستای رشد مرجح، یک دانه سرگردان با انحراف زیاد نسبت به راستای مرجح محسوب می‌شود و سبب افت خواص مکانیکی در دمای بالا می‌شود.



شکل ۱۰ تصاویر قطبی شبیه‌سازی‌شده برای دو سرعت رشد ۳ و ۵ mm/min

به‌منظور بررسی صحت نتایج شبیه‌سازی عددی ریزساختار انجمادی، ریزساختار نمونه‌های سوپر آلیاژ پایه نیکل در شکل (۱۱) ارائه شده است. در شکل (۱۱- الف) ساختار نمونه آلیاژ رشد داده شده با سرعت ۳ میلی‌متر بر دقیقه مشاهده می‌شود. همان‌گونه که در این شکل مشاهده می‌شود، مرز قابل‌تشخیص که نشان‌دهنده دانه سرگردان باشد، مشاهده نمی‌شود. ردیف منظم دندریت‌ها در راستای بلوری <۰۰۱> در این تصویر مشاهده می‌شود. در شکل (۱۱- ب) ریزساختار نمونه آلیاژ رشد داده شده با سرعت ۵ میلی‌متر بر دقیقه ارائه شده است. دو دانه با مرز مشخص در این تصویر مشخص شده است. مرزدانه در این تصویر با استفاده از پیکان‌های مشکی مشخص شده است.

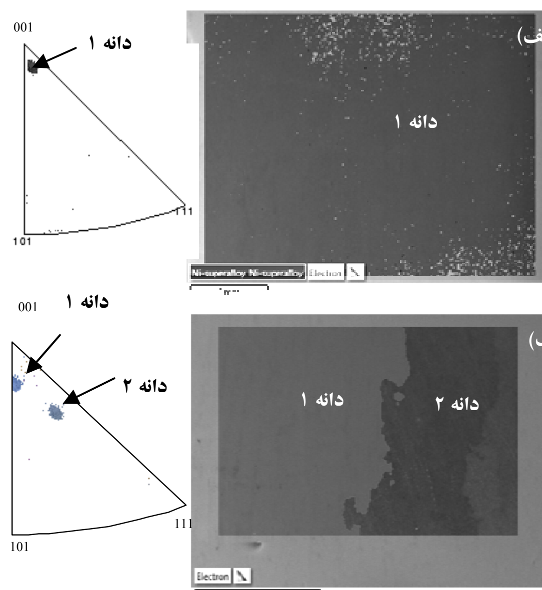


شکل ۱۱ ریزساختار نمونه سوپر آلیاژ پایه نیکل که با سرعت الف) ۳ میلی‌متر بر دقیقه؛ ب) ۵ میلی‌متر بر دقیقه رشد داده شده است

شکل (۱۲) نقشه جهات بلوری و تصویر معکوس قطبی در مقطع عرضی نمونه آلیاژ تک‌بلور را که با

سرعت ۳ و ۵ میلی‌متر بر دقیقه رشد داده شده است، ارائه می‌نماید. نقشه جهات بلوری نمونه رشد داده شده با سرعت ۳ میلی‌متر بر دقیقه عدم وجود مرزدانه مشخص را نشان می‌دهد. لیکن در مورد نمونه با سرعت رشد ۵ میلی‌متر بر دقیقه وجود دو دانه به‌طور مشخص قابل‌تشخیص است. تصاویر معکوس قطبی نیز مؤید این مطلب است که در نمونه با سرعت رشد ۵ میلی‌متر بر دقیقه دو دانه با اختلاف جهت‌گیری زیاد قابل‌مشاهده است.

همان‌گونه در مورد نمونه رشد داده شده در سرعت ۳ میلی‌متر بر دقیقه مشاهده می‌شود، یک دانه متمایل به قطب <۰۰۱> و دارای انحرافی برابر ۹ درجه به وجود آمده است.



شکل ۱۲ نقشه جهات بلوری و تصویر قطبی معکوس نمونه تک‌بلور سوپر آلیاژ پایه نیکل در سرعت رشد الف) ۳ میلی‌متر بر دقیقه؛ ب) ۵ میلی‌متر بر دقیقه

نتیجه‌گیری

بررسی نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی انتقال حرارت و ریزساختار و مقایسه آن با نتایج تجربی، نشان‌دهنده همخوانی مناسب نتایج مدل عددی توسعه داده شده برای سوپر آلیاژ پایه نیکل با یافته‌های آزمون‌های تجربی است. مطالعات پارامتریک انجام‌شده با استفاده از مدل عددی توسعه‌یافته در این تحقیق نشان‌دهنده کاهش گرادیان دمایی با افزایش سرعت رشد نمونه در فرآیند انجماد جهت‌دار است. برای مثال، افزایش سرعت رشد از ۳ به ۵ میلی‌متر بر دقیقه، گرادیان دمایی در نقطه‌ای به فاصله ۸۰ میلی‌متر از مبرد، از ۳۲ به ۲۸ درجه سانتی‌گراد بر سانتیمتر کاهش می‌یابد. همچنین نتایج بررسی‌های نشان‌دهنده کاهش گرادیان دمایی در نمونه با افزایش فاصله از سطح مبرد است. این مسئله به سبب کاهش تأثیر سرمایش ناشی از خروج حرارت از مبرد با فاصله گرفتن از آن است. بنا بر معیار هانت، تبدیل رشد ستونی به هم‌محور و جوانه‌زنی و رشد دانه‌های سرگردان، متأثر از گرادیان دمایی و سرعت رشد نمونه و همچنین سینتیک رشد دانه است. سینتیک رشد دانه نیز به‌نوبه خود متأثر از ترکیب شیمیایی آلیاژ است. محاسبات انجام‌شده با استفاده از مدل ارائه‌شده توسط Kurz-Giovanola-Trivedi (KGT)، مقادیر α_2 و α_3 (ضرایب سینتیکی رشد دندریت) برای سوپرآلیاژ پایه نیکل به ترتیب برابر $4.1\times10^{-7}\ m.s^{-1}.K^2$ و $6.6\times10^{-7}\ m.s^{-1}.K^3$ مورد محاسبه قرار گرفت.

براساس محاسبات صورت گرفته برای سوپر آلیاژ پایه نیکل و بر مبنای معیار تبدیل رشد ستونی به هم‌محور که توسط هانت ارائه شده است، جهت جلوگیری از تشکیل دانه‌های سرگردان در نمونه آلیاژ مذکور در فرآیند رشد تک‌بلور، در گرادیان دمایی بین ۲۰ الی ۳۰ درجه سانتی‌گراد بر سانتیمتر، سرعت رشد نمونه می‌بایست در حدود ۳ میلی‌متر بر دقیقه اعمال گردد. نتایج شبیه‌سازی عددی و همچنین نتایج عملی رشد تک‌بلور سوپرآلیاژ پایه نیکل نیز مؤید این مطلب است.

بررسی‌های انجام‌شده نشان‌دهنده این امر است، که برای سوپرآلیاژ پایه نیکل در فرآیند رشد تک‌بلور، در سرعت سرد شدن بیش از ۰/۳ درجه بر ثانیه امکان جوانه‌زنی دانه سرگردان وجود دارد.

مراجع

1. Reed R.C., "The Superalloys: Fundamentals and Applications", *Cambridge University Press*, Cambridge, (2006).
2. Ross E.W., Sims C.T., "Superalloy", *John Wiley & Sons*, New York, (1987).
3. Gell M., Duhl D.N., Giamei A.F., "Superalloys", *American Society for Metals*, Metals Park, OH, (1980).
4. McLean M., "Directionally Solidified Materials for High Temperature Service", *The Metals Society*, (1983).
5. Versnyder F., Shank F.E., "The Development of Columnar Grain and Single Crystal High Temperature Materials through Directional Solidification", *Materials Science and Engineering*, Vol. 6, pp. 213-247, (1970).
6. Zhou Y.Z., Green N.R., "Mechanism of Competitive Grain Growth In Directional Solidification Of A Nickel-Base Superalloy", *Acta Materialia*, Vol. 56, pp. 2631–263, (2010).
7. Meng X.B., Lua Q., Zhang X.L., Li J.G., Chen Z.Q, Wang Y.H., Zhou Y.Z., Jin T., Sun X.F., Hu Z.Q., "Mechanism Of Competitive Growth During Directional Solidification Of A Nickel-Based Superalloy In A Three-Dimensional Reference Frame", *Acta Materialia*, Vol. 60, pp. 3965–3975, (2012).
8. Xinbao Zh., Lin L., Weiguo Zh., Min Q., Jun Zh., Hengzhi F., "Analysis of Competitive Growth Mechanism of Stray Grains of Single Crystal Superalloys during Directional Solidification Process", *Rare Metal Materials and Engineering*, Vol. 40, 9 -13, (2011).
9. Zhou Y.Z., Green N.R., "Mechanism of Competitive Grain Growth in Directional Solidification of A Nickel-Base Superalloy", *Acta Materialia*, Vol. 56, pp. 2631–2637, (2011).
10. Zhou Y., Volek A., "Effect Of Carbon Additions On Hot Tearing Of A Second Generation Nickel-Base Superalloy", *Materials Science and Engineering A*, Vol. 479, pp. 324-332, (2009).
11. Cutler E.R., Wasson A.J., Fuchs G.E., "Effect Of Minor Alloying Additions On The Solidification Of Single-Crystal Ni-Base Superalloys", *Journal of Crystal Growth,* Vol. 311, pp. 3753–3760., (2009).
12. Gunduz M., Adirli E.C., "Directional Solidification of Aluminium–Copper Alloys", *Materials Science and Engineering A*, Vol. A327, pp. V, (2002).
13. Ares A.E., Gueijman S.F., Schvezov C.E., "An Experimental Investigation of The Columnar-To-Equiaxed Grain Transition In Aluminium–Copper Hypoeutectic And Eutectic Alloys", *Journal of Crystal Growth,* Vol. 312, pp. 2154–2170, (2010).
14. Willers B., Eckert S., Michel B., Haase I., Zouhar G., "The Columnar-To-Equiaxed Transition In Pb–Sn Alloys Affected By Electromagnetically Driven Convection", *Materials Science and Engineering A*, Vol. 402, pp. 55-65, (2005).
15. Dong Q., Zhang J., Dong J., Xie H., Li Zh., Dai Y., Liu Y., Sun B., "In Situ Observation of

Columnar-To-Equiaxed Transition In Directional Solidification Using Synchrotron X-Radiation Imaging Technique", *Materials Science and Engineering A*, Vol. 530, pp. 271-276, (2011).

16. Dantzig J.A., Rappaz M., "Solidification", EPFL Press, (2009).
17. Rappaz M., "Probabilistic Modeling of Microstructure Formation in Solidification Processes", *Acta Metallurgica Materialia*, Vol. 41, pp. 345-360, (1993).
18. Lin Zh., Cai-bei Zh., "Two-Dimensional Cellular Automaton Model for Simulation Structure Evolution of Binary Alloys during Solidification", *Transactions of nonferrous metals society of China*, Vol. 16, pp. 1410-1416, (2006).
19. Ying L., Qingyan L., Baicheng L., "A Modified Cellular Automaton Method for The Modelling Of Dendritic Morphology Of Binary Alloys", *Tsinghua Science and Technology*, Vol. 11, pp. 495-500, (2006).
20. Gandin Ch., Rappaz M., "a coupled finite element cellular automaton model for the prediction of the dendritic grain structure in solidification processes", *Acta Metallurgica Materialia*, Vol. 42, No. 7, pp. 2233-2246, (1994).
21. Gandin Ch., Desbioles J., Rappaz M., Thevez Ph., "A three-dimensional cellular automaton-finite element model for prediction of solidification grain structures", *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 30A, pp. 3153-3165, (1999).
22. Toloraiy, V.N., Orekhov N.G., Kablov E.N., "Advanced Method for Single Crystal Casting Of Turbine Blades For Gas Turbine Engines And Plants", *Metal Science and Heat Treatment*, Vol. 44, No. 7 – 8, pp.11-16 (2002).
23. Poirier D.R, "Transport phenomena in materials processing", ed. TMS. (1994).
24. Kurz W., Fischer D.J., "Fundamentals of Solidification", Trans Tech Publications, (1986).
25. Kurz W., Giovanola B., Trivedi R., "Theory of Microstructural Development during Rapid Solidification", *Acta Metallurgica Materialia,* Vol. 34, No. 5, pp. 823.-830, (1986).
26. Elliott, A.J., Tin S., King W.T., Huang S.C, Gigliotti M.F., Pollock T.M., "Directional Solidification of Large Superalloy Castings with Radiation and Liquid-Metal Cooling: A Comparative Assessment", *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 35A, pp. 3221-3231, (2004).
27. Li, X., Fautrelle Y., Ren Zh., Gagnoud A., Zhang Y., Esling C., "Morphological instability of interface, cell and dendrite during directional solidification under strong magnetic field", *Journal of Crystal Growth,* Vol. 318, pp. 23–27, (2011).
28. Zhou, Y., "Formation of stray grains during directional solidification of a nickel-based superalloy", *Scripta Materialia*, Vol. 65, pp. 281–284, (2011).